2次元正方格子上の拡張ハバードモデルにおけるトリプレット超伝導(スピン三重項超伝導をめぐって)

尾崎, 正明; 宮井, 英次

2次元正方格子上の拡張ハバードモデルにおけるトリプレット超伝導

高知大理・尾崎正明、北大理・宮井英次

オンサイト斥力、最近接のサイト間に引力と交換力のある場合の2次元ハバードモデルを考える。ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{<i,j>s}(-t-\mu\delta_{ij})(a^{\dagger}_{is}a_{js}+H.C)+U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\\ &+ V\sum_{<ij>}\sum_{ss'}n_{is}n_{js'}+J\sum_{<ij>}\sum_{ss'}a^{\dagger}_{is}a^{\dagger}_{js'}a_{is'}a_{js}\end{aligned}$$

運動量表示では

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{ks}(-2t\gamma_k-\mu)a^{\dagger}_{ks}a_{ks}\\ &+ \sum_{kk'q}\sum_{ss'}<k+qs,k's'|V|ks,k'+qs'>a^{\dagger}_{k+qs}a^{\dagger}_{k's'}a_{k'+qs'}a_{ks},\\ a^{\dagger}_{ks} &= \frac{1}{L}\sum_{n}e^{ikn}a^{\dagger}_{ns},\\ \gamma_k &= \cos k_x+\cos k_y\\ <k &+ qs,k's'|V|ks,k'+qs'>=\frac{1}{L}(U+2V\gamma_q+2J\gamma_{k-k'}),\end{aligned}$$

であり、Lは格子点の数である。

系は次の対称性を持つ。

$$\begin{aligned}G_0 &= P\times S\times R\\ P &= L(e_x,e_y)\wedge D_{4h}: \quad \text{正方格子の空間群}\\ S &= \text{the Group of Spin Rotation} \quad :SU(2)\\ R &= \Phi+t\Phi\\ \Phi &= \text{the Group of Gauge Transformation}\\ t &= \text{time reversal}\end{aligned}$$

相互作用 $Z(k,k')=<ks,-ks|V|k's,-k's>$の既約分解によりトリプレット超伝導は$G_0=P\times S\times R$の既約表現 $E_u\otimes\check{S}^1\otimes\check{R}^2$より導かれる。ここで$E_u$は$D_{4h}$の2次元表現、$\check{S}^1$は$S$の角運動量 $j=1$ に対応する3次元表現、$\check{R}^2$はRのゲージ対称性を破る2次元表現である。この既約表現での極大小群を求める事により、次表の8種類のトリプレット超伝導が得られる。第2列は平均場ハミルトニアン

$$\begin{aligned}H_m &= H^{00}_m+H^{01}_m+H^1_m\\ H^{00}_m &= \sum_{ks}x_0(k)a^{\dagger}_{ks}a_{ks}\\ H^{01}_m &= \sum_{ks}y^{\lambda}_0(k)a^{\dagger}_{ks}a_{ks'}\sigma^{\lambda}_{ss'},\\ H^1_m &= \frac{1}{2}\sum_{k}\sum_{ss'}z^{\lambda}(k)a^{\dagger}_{ks}a^{\dagger}_{-ks'}(i\sigma^{\lambda}\sigma^y)_{ss'}+H.C\end{aligned}$$

の超伝導に対応するハミルトニアン H_m^1 を表す。

Table 1. The maximal little groups and the corresponding pairing Hamiltonian H_m^1.

$\mathbf{T} = \{e, t\}$, $\mathbf{C}_{2vx} = \{e, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\}$, $\mathbf{A}(\mathbf{e}_z) = \{u(\mathbf{e}_z, \theta) | 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$, $\mathbf{C}_{2va} = \{e, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\}$, $\tilde{\mathbf{C}}_4 = \{e, \widetilde{C_{4z}^{+}(\pi/2)}, C_{2z}\tilde{\pi}, \widetilde{C_{4z}^{-}(-\pi/2)}\}$, ${}_{\mathrm{II}}\mathbf{D}_4 = \{pu(p) | p \in \mathbf{D}_4\}$, ${}_{\mathrm{S}}\tilde{\mathbf{C}}_4 = \{e, C_{4z}^{+}u_{2a}(\widetilde{\pi/2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^{-}u_{2a}(\widetilde{-\pi/2})\}$, ${}_{\mathrm{II}}\mathbf{D}_2 = \{e, C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}, C_{2z}u_{2z}\}$, $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{e}_z) = \{u(\mathbf{e}_z, \theta)\tilde{\theta} | 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$, $\mathbf{C}_{2x} = \{e, C_{2x}\}$, $\mathbf{C}_{2a} = \{e, C_{2a}\}$,

where e = identity, $u_{2i} = u(\mathbf{e}_i, \pi)$, and $u(p)$ is the spin rotation about the same rotation axis by the same rotation-angle as p. In $G(Eu;3) \sim G(Eu;8)$, factor $(e + I\tilde{\pi})$ is omitted.

Maximal little group	H_m^1 with H.C. omitted
$G(E_u;1) = (e + C_{2z}\tilde{\pi})(e + C_{2z}u_{2x})\mathbf{C}_{2vx}\mathbf{L}\mathbf{A}(\mathbf{e}_z)\mathbf{T}$	$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}ss'} c \sin k_x a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^z)_{ss'}$
$G(E_u;2) = (e + C_{2z}\tilde{\pi})(e + C_{2b}u_{2x})\mathbf{C}_{2va}\mathbf{L}\mathbf{A}(\mathbf{e}_z)\mathbf{T}$	$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}ss'} c(\sin k_x + \sin k_y) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^z)_{ss'}$
$G(E_u;3) = (e + u_{2x}\tilde{\pi})(e + tC_{2x})\tilde{\mathbf{C}}_4\mathbf{L}\mathbf{A}(\mathbf{e}_z)$	$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}ss'} c(\sin k_x + i \sin k_y) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^z)_{ss'}$
$G(E_u;4) = (e + C_{2x}u_{2y}\tilde{\pi})_{\mathrm{II}}\mathbf{D}_4\mathbf{L}\mathbf{T}$	$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}ss'} c(\sin k_x (\tau^x)_{ss'} + \sin k_y (\tau^y)_{ss'}) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger}$
$G(E_u;5) = (e + tu_{2x})_{\mathrm{II}}\mathbf{D}_2\,{}_{\mathrm{S}}\tilde{\mathbf{C}}_4\mathbf{L}$	$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}ss'} c(\sin k_x (\tau^x)_{ss'} + i \sin k_y (\tau^y)_{ss'}) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger}$
$G(E_u;6) = (e + C_{2z}u_{2z})(e + tu_{2x})\mathbf{C}_{2x}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{e}_z)\mathbf{L}$	$\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}ss'} d \sin k_x a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$
$G(E_u;7) = (e + C_{2z}u_{2z})(e + tu_{2x})\mathbf{C}_{2a}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{e}_z)\mathbf{L}$	$\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}ss'} d(\sin k_x + \sin k_y) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$
$G(E_u;8) = (e + tC_{2z}u_{2x})\tilde{\mathbf{C}}_4\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{e}_z)\mathbf{L}$	$\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}ss'} d(\sin k_x + i \sin k_y) a_{\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}s'}^{\dagger} (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$

$G(E_u;6), G(E_u;7), G(E_u;8)$ はいわゆる non-unitary state で up-spin の電子だけがペアリングに参加する。$t = 1, V = -2, U = 2$ でホールドーピングが大きい時の強磁性が出やすい条件では non-unitary state の $G(E_u;8)$ が最安定であることが分かった。またＳＣＦ条件より、non-unitary state が出現するとパウリ的な強磁性が生じることが示された。又 $G(E_u;1), G(E_u;6)$ 状態は格子変形が生じる事が示された。

関係する発表論文

1)M. Ozaki, E.Miyai, T. Konishi and K. Hanafusa: Int. J. Mod. Phys. **B10**,1397(1996).
2)E.Miyai and M. Ozaki: Int. J. Mod. Phys. **B11**,1153(1997).